



DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

Dalyko (modulio) pavadinimas lietuvių kalba	Dalyko (modulio) pavadinimas anglų kalba	Kodas
Kvantinė chemija	Quantum chemistry	

Dėstytojas (-ai)	Padalinys (-iai)
Koordinuojantis: Kęstutis Aidas Kitas (-i):	Chemijos ir geomokslų fakultetas, Chemijos institutas Naugarduko 24, LT-03225 Vilnius

Studijų pakopa	Dalyko (modulio) tipas
Pirmoji	Privalomasis

Igyvendinimo forma	Vykdymo laikotarpis	Vykdymo kalba (-os)
Auditorinė	3 (rudens) semestras	Lietuvių

Reikalavimai studijuojančiajam	
Išankstiniai reikalavimai: Bendroji chemija, Matematika I/II, Fizika I	Gretutiniai reikalavimai (jei yra):

Dalyko (modulio) apimtis kreditais	Visas studento darbo krūvis	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiško darbo valandos
5	134	64	70

Dalyko (modulio) tikslas: studijų programos ugdomos kompetencijos			
Dalyko tikslai: - supažindinti su kvantinės mechanikos teorija bei pagrindinėmis jos koncepcijomis - supažindinti su kvantmechaniniais modeliais, kurie plačiai taikomi chemijoje molekulėms ir jų elgsenai aprašyti - suformuoti kvantinės mechanikos pagrindų taikymo įgūdžius			
Programos numatomi studijų rezultatai	Dalyko (modulio) studijų siekiniai	Studijų metodai	Vertinimo metodai
	Studentai įgis bendrosios kvantinės mechanikos teorijos pagrindus bei susipažins su svarbesniais jos taikymais molekulėms ir jų elgsenai apibūdinti. Studentai gebės: - interpretuoti cheminius reiškinius pasitelkiant kvantinės mechanikos koncepcijas - spręsti kvantinės chemijos probleminius uždavinius	Paskaitos, seminarai, savarankiškas darbas	Kolokviumas ir egzaminas raštu

Temos	Kontakt. darbo valandos					Visas kontakt. darbas	Savarankiškas darbas	Savarankiškų studijų laikas ir užduotys
	Paskaitos	Seminarai	Pratybos	Lab. darbai	Praktika			Užduotys
1. Kurso apžvalga	1					1		
2. Kvantinės mechanikos formalizmas: banginė funkcija ir jos prasmė, superpozicijos principas, standartiniai reikalavimai, operatoriai kvantinėje mechanikoje, fizikinių dydžių vidurkiai, tikrinių verčių lygtis, tikrinių funkcijų ortogonalumas, operatorių komutatorius, bendroji ir stacionarioji Šrėdingerio lygtis, statistinė kvantinės mechanikos interpretacija, Haizenbergo neapibrėžtumo principas, judėjimo integralai, kvantinės mechanikos postulatai, bra-ket formalizmas.	9	10				19	24	Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas
3. Paprastosios kvantinės sistemos I: laisvos dalelės judėjimas, dalelių sklaida nuo potencinės energijos barjerų, tuneliavimas, dalelė potencinės energijos duobėje, harmoninis osciliatorius.	6	6				12	12	Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas
4. Judesio kiekio momento teorijos pagrindai: judesio kiekio momento operatoriai ir jų komutaciniai sąryšiai, operatorių L^2 ir L_z tikrinės vertės bei tikrinės funkcijos, operatoriai L_+ ir L_- , judesio kiekio momento operatorių matriciniai elementai	4	4				8	8	Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas
5. Paprastosios kvantinės sistemos II: dalelės sukimasis plokštumoje ir trimatėje erdvėje, kietasis rotatorius.	2	2				4	4	Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas
6. Vandeniškieji atomai: Šrėdingerio lygtis ir jos sprendiniai, atominės orbitalės, energijos lygmenys, spektroskopija, elektroninių šuolių atrankos taisyklės.	4	6				10	12	Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas
7. Mikrodalelių sukinys	2	2				4	4	Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas
8. Daugiadalelių sistemų kvantinės mechanikos pagrindai: operatoriai ir Šrėdingerio lygtis, tapatingosios dalelės, Paulio principas, Sleiterio determinantas, atomų elektroninės konfigūracijos, periodinė cheminių elementų lentelė.	4	2				6	6	Literatūros skaitymas, uždavinių sprendimas
Viso:	32	32				64	70	

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
Kolokviumas	50	Semestro metu	Teorijos klausimai atsakyti ir uždaviniai išspręsti (raštu)
Egzaminas	50	Sesijos metu	Teorijos klausimai atsakyti ir uždaviniai išspręsti (raštu)

Autorius	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio Nr. ar leidinio tomas	Leidimo vieta ir leidykla	Prieiga internete ar VU bibliotekoje
Privalomoji literatūra					
P. Atkins, R. Friedman	2011	Molecular quantum mechanics, 5 th ed.		Oxford University Press	
A. Bandzaitis, D. Grabauskas	1975	Kvantinė mechanika		Mokslas, Vilnius	
Papildoma literatūra					
D.J. Griffiths	2005	Introduction to quantum mechanics		Pearson Prentice Hall	
I.N. Levine	2014	Quantum chemistry, 7 th ed.		Pearson	